

数式モデルを用いた化学工学演習
Computer-aided Experiment of Chemical Engineering using Equation Models

横山 克己

Katsumi YOKOYAMA

株式会社オメガシミュレーション (明治大学兼任講師)

Omega Simulation Co. Ltd.

Received : November 27, 2012 Accepted : January 19, 2013

Synopsis : In order to teach a problem design and solution methodology using equation models, a trial of a series of computer-aided exercises was performed using the equation solver EQUATRAN. These exercises start from the basic phenomenon of vapor-liquid equilibrium, separation calculations performed by adding equation models, and built into industrial equipment called a distillation column. Through these exercises it is possible to develop the ability to consider problems systematically.

Keywords : Equation models, Equation solver, Computer-aided exercises, Vapor-liquid equilibrium, Distillation

I 緒言

化学工学会から「化学工学会の将来像についての提言」(化学工学会編, 2002) という報告書が提出され、そのなかで化学工学の体系が論じられている。20 世紀初頭、石油・石油化学産業の創世期に確立し、物理操作の科学的設計法がいわゆる「単位操作」として分類・整理された。1940 年代には化学プロセスの中核である反応装置を設計するために「反応工学」の体系が整理され、1960 年代後半にはプロセス全体をシステムとして考える「プロセス工学」、「プロセスシステム工学」が生まれた。1970 年代には現在の化学工学体系がほぼ確立したといい、「化学工学は、産業・社会の要請に応える形で体系化されていった歴史の中で、必然的に問題解決型の方法論をも備えるようになっていた。」としている。

大学に目を転じると、「化学工学科」という看板を掲げた大学は数えるくらいになってしまったが、2001 年から JABEE (Japan Accreditation Board for Engineering Education : 日本技術者教育認定機構) の認定が開始され、化学分野の化学工学コースは先駆的な役割を果たしてきた。この影響もあってか、ここ 10 年くらいに「化学工学」が含まれる名前の書籍が 10 数冊集中的に出版されている。教科書に当たるいくつかを手にとってみると、流動、伝熱、反応、蒸留など単位操作を主体に構成されている。「化学工学科」自体が減っても、化学工学を教える学科は依然として数多く存在している。

一方、産業界に目を向けると、プロセス産業では集中と選択の時代を経て現場での技術力の劣化が叫ばれており、技術力強化、現場力強化に各社取り組み始めている。事故が増加傾向にあるとともに、温室効果ガス削減という課題もあり、化学工学技術者が求められている。応用化学(特に化学工学系)の卒業生は、かつて石油化学・化学・石油精製産業などのプロセス産業やプラント建設のエンジニアリング産業への就職が中心であったが、最近では自動車、電機、ソフトウェアなど多方面の産業に人材を輩出している。

本稿ではこのような背景をふまえて、問題設計・解決型の方法論を教授するためのコンピュータ演習の提案とそれを実施した試みを述べる。

II これまでの取り組み

化学工学では解析・設計するためには対象となる現象を、数式モデルを作成して取り組むことになる。物質収支や熱収支に代表されるバランスを考えるモデルでは線形・非線形連立方程式で表現されることが多い。また、反応速度方程式、移動速度など時間に関与する場合には、非線形、かつ連立の常微分方程式で記述される。場合によっては偏微分方程式になる。

さて、ここで少し振り返ってみると、化学工学では多様な方程式を取り扱うため、その解法には早くからコンピュータを使った数値計算が使われていた。1976 年に化学工学協会(現在の化学工学会)が編集した『化

学工学プログラミング演習』が発刊されている。ここで使われていたプログラミング言語はFORTRANである。各方程式を解くためにいろいろなアルゴリズムが紹介されていた。1985年にはほとんど同じ例題を用いて『BASICによる化学工学プログラミング』が発刊された。パソコンが普及し始めた時期で言語にBASICが使われた。数値計算がより身近になってきたが、手続き型言語でプログラミングするところはあまり変わっていなかった。

大学教育ではコンピュータ利用技術の一環としてFORTRANが長く教えられてきた。ここ10年くらいはFORTRANが使える処理系が限られてきたため、C言語やJavaなどが試みられた。しかし、プログラミング言語は本来手段であるはずで、限られた時間のなかでその習得に時間を割くのはどうかと最近ではそれを教えることの必要性に疑問が持たれはじめている。代わって広く使われているExcelを採用する大学が増えてきた。また、『化学工学』誌に連載された記事をもとに2006年には伊東ら(2006)による『Excelで気軽に化学工学』が発刊されている。Excelは事務計算用の表計算ソフトから出発したもので、データ処理やグラフ化の機能は優れているが、方程式を解法するという点では力不足である。特に、微分方程式を解法するための数値積分の機能はなく、連立方程式は行列演算に直す必要があるが、これが非線形方程式や微分方程式と組み合わせると解法は不可能である。先の書籍ではこれをVBAという組み込みのBASIC言語を用いて解決している。

III 方程式解法ソフトによる演習

1. 提案するコンピュータ演習

先に触れたように教科書は単位操作主体に構成されているが、そこに提示されている例題の解法は解析的に行っていたり、図解法を用いていたりとコンピュータの存在を意識した記述は少ない。パソコンを用いた演習をどこの大学でも取り入れており、コンピュータやソフトの存在を前提にした解法が求められている。米国ではプロセスシミュレータや数値計算ソフトを前提にしたテキストが1990年代終わりごろから出版されており、たとえばSeiderら(2003)による教科書がある。

さて、大学教育での情報技術教育という場合に、コンピュータ・リテラシーやコンピュータ利用技術としての情報技術の習得と、学習が効果的になるような情

報技術を活用した教育に大別できよう。前者は、従来からFORTRAN、BASICに代表されるプログラム言語教育が行われてきた。最近ではリテラシーの意味から低学年でWordやExcelのソフト利用やWeb活用などの習得が組み入れられ、一部の大学では高学年でプロセスシミュレータを使った教育も行われている。また一方、後者では、マルチメディアやWebを活用した教材、eラーニングの試みがなされている(伊東, 2008)。本稿では前者を対象とし、技能としてツールを活用し、問題設計・解決型の方法論を身につけることを目指している。

冒頭に引用した報告書では、問題解決型方法論の説明として「どのような対象も一つのシステムとして捉え、そのシステムをいくつかの要素の結合として表現する。最終的な成績に対する感度を考えることで支配因子を明らかにしつつ要素のモデル化を行う。」とある。化学工学の単位操作はそれぞれ高度化・細分化しており、かつてのように単位操作を修得することよりも、システム全体の挙動を把握し、その支配原理を明らかにし、システムの解析と設計が行える素養が要求される。

この意味から、単位操作が予めモデルとして組み込まれているプロセスシミュレータを、授業に取り入れている大学もあるが、長谷部(2006)は各装置がブラックボックスになっており、単位操作の理解が進まないという問題点を指摘して、「方程式ベースのシミュレータを導入することを検討すべきである」としている。

2. 方程式解法ソフトの活用

数式モデルを容易に表現して解法するには、方程式解法ソフトの利用が有効である。方程式解法ソフトは様々な数値計算を方程式表記のまま扱おうという発想である。国内ではEQUATRAN-G(Yokoyamaら, 1999)が、海外ではPOLYMATH(Cutlipら, 1999)というソフトが存在する。

ここでその端的な例を紹介する。反応では基礎式が常微分方程式になるが、通常の教科書では基礎式を解析的に解いて式変形した上で計算するような説明がなされている。

たとえば、 $A \rightarrow B$ で表される回分反応器の解法で、反応速度式は濃度 C_A の1次に比例すると仮定すると

$$-r = \frac{dC_A}{dt} = kC_A \quad (1)$$

で表される。このケースは解析的に

$$-\ln(C_A/C_{A0}) = kt \quad (2)$$

と解くことができる。時間 t に対する濃度 C_A の変化を求めるためには、この式を変形して

$$C_A = C_{A0} \exp(-kt) \quad (3)$$

を計算することになる。

これに対して方程式解法ソフトでは、(1)式の常微分方程式をそのまま記述して計算できる。さらに、このケースのように解析解が求まる場合はよいが、現実の問題では濃度のべき乗に比例する、あるいは複数成分が関与するなど反応方程式がより複雑であり、解析解そのものが求まらない場合もある。

IV 演習の実施例

1. 演習の流れ

明治大学の応用化学科では、化学情報実験として学部2年生、3年生の2年間4単位を割り当て、分子構造計算、統計計算、数値計算、分子動力学シミュレーション、化学工学計算などをパソコンルームで学生ひとりに1台の Windows パソコンを割り当てて演習を行っている。化学工学計算は3年生後期に1日2コマを6日かけ、方程式解法ソフトにはEQUATRAN-GとVM-EQUATRANを使って実施している。

ここではその一部から、化学工学の単位操作でも代表的な気液平衡、蒸留計算を例に取り、この演習の長所、特質を説明する。

演習の課題として水とエタノールの混合物の分離を取り扱う。演習の流れを図1に示す。

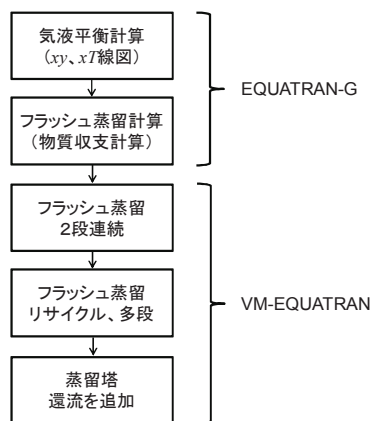


図1 演習の流れ

2. 演習内容

(1) 気液平衡計算

水とエタノールの混合物で気体と液体が接触して平衡状態を形成した場合に、気相組成 y と液相組成 x の関係について考える。混合物での気相と液相の関係は、ラウールの法則（気相中の成分 A の分圧 p_A がその成分の蒸気圧 P_{0A} と液相組成 x_A の積で与えられる）で表現される理想溶液からの偏奇を活量係数 γ で表す。蒸気圧 P_0 は Antoine 式での推算がよく使われ、活量係数 γ は Wilson 式などで推算される。したがって、以下のように順にラウールの法則、蒸気圧式（Antoine 式）、活量係数式（Wilson 式）、組成の総和が1の5本の非線形連立方程式で記述できる（実際は2成分なので8つの方程式になる）。なお、ここで使用しているパラメータ A 、 B 、 C と Λ は定数として与えられる。全圧 P と液相組成 x_i を与えて、気相組成 y_i と温度 T を求める。

$$P y_i = \gamma_i P_{0i} x_i \quad (i=1,2) \quad (4)$$

$$\log P_{0i} = A_i - B_i / (T + C_i) \quad (5)$$

$$\ln \gamma_i = -\ln \left(\sum_j x_j \Lambda_{ij} \right) + 1 - \sum_k \frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_j x_j \Lambda_{kj}} \quad (6)$$

$$\sum x_i = 1, \quad \sum y_i = 1 \quad (7)$$

方程式解法ソフトである EQUATRAN-G を用いると、これらの関係式をそのまま入力することで解法できる。

```

P * y = g * P0 * x
LOG10 (P0) = A - B / (T + C)
LOGE (g) = -LOGE (SUM (x*Lam)) + 1 - SUM ((x*Lam~) / SUM (x*Lam))
SUM (x) = 1; SUM (y) = 1
  
```

図2 EQUATRAN-G ソーステキスト

Wilson 式の形が少し複雑なので、記述が難しそうに感じるかもしれないが、方程式と比べてもらえば元の方程式の形を維持していることが分かる。これを従来の数値計算で解こうとするとニュートン法などの繰り返し収束計算が必要になり、かなり長いプログラムを作成しなければならない。EQUATRAN を用いれば数式モデルそのもので議論ができるうえ、短時間に解を得ることができる。

(2) フラッシュ蒸留 (EQUATRAN-G の場合)

図3のようなフラッシュドラムによる分離装置を考える。

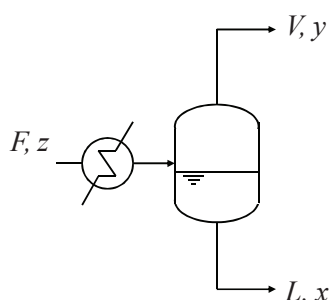


図3 フラッシュドラム

気液平衡計算の関係式に、入出のバランスをとった物質収支式を追加するとフラッシュ蒸留の計算に拡張できる。フィード量 F 、気相流量 V 、液相流量 L を導入して、以下の2つの方程式を追加するだけである。

$$L + V = F \quad (8)$$

$$Lx_i + Vy_i = Fz_i \quad (9)$$

これで 40 mol% エタノール水溶液を供給した場合に、83 °C に保つと気相、液相それぞれでどのくらいの流量と組成が得られるかが計算できる。ちなみに 55.5 % が蒸気になり、そのエタノールの組成は約 54 mol% になる。

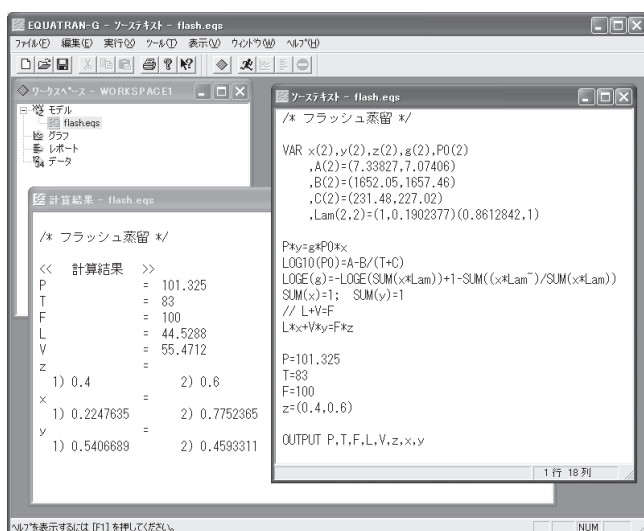


図4 フラッシュ蒸留 (EQUATRAN-G の画面)

(3) フラッシュ蒸留 (VM-EQUATRAN の場合) つぎにブロックフロー図を用いて、モデリングがで

きる VM-EQUATRAN を用いる。まず、同じフラッシュ蒸留計算を行う。流量、組成などのフィード条件はフィードというモジュールに与え、フラッシュ蒸留に伝達して計算を行い、気相側、液相側の製品を得る。それぞれをモジュールとして作成する。

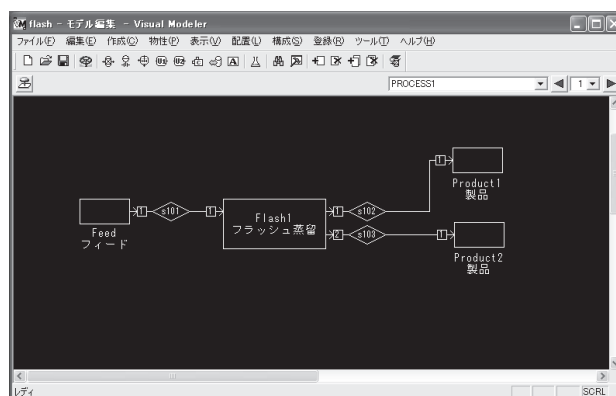


図5 フラッシュ蒸留 (VM-EQUATRAN の画面)

今まではテキストで考えていたが、ブロックフロー図に置き換えたことで、より視覚的に捉えることができる。図のフラッシュ蒸留というモジュールには、前節の EQUATRAN-G のソーステキストが組み込まれており、同じ結果を得ることができる。

さらに精製を進めるために、図6のようにこのフラッシュ蒸留のブロックをコピーして3つに増やし、フラッシュ蒸留を直列の2段にしてみる。フラッシュ蒸留での分離はそれぞれ同じ流量になるように温度を調整する。

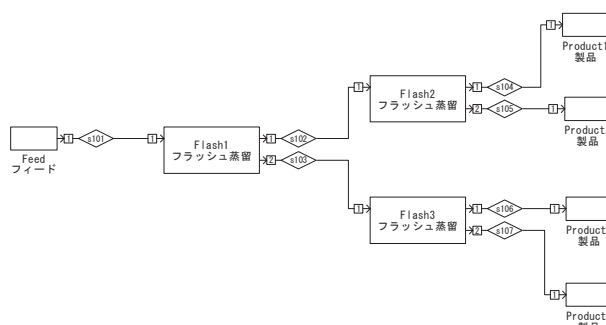


図6 2段フラッシュ蒸留モデル(1)

4つの製品の内2つはフィード組成に近いので、上流側にリサイクルするようにつなぎ替える。図7のように2つの製品のブロックを取り除き、上流側に合流点のブロックを加える。この結果、蒸気側のエタノールの組成は約 66 mol% に高められる。



さらに図8のように、フラッシュ蒸留を2つ増やして積み重ね、段数が5段の蒸留塔を組み立てる。蒸留塔の重要な要素である還流ブロックを追加して、塔頂からの流量の一部を還流する。

1つのフラッシュ蒸留を1つのモジュールにして、これを3つ、5つと組み合わせていき、最終的には蒸留塔という工業的に用いられている装置を組み立てる

IV 学習の効果

多くの「化学工学」の教科書では、フラッシュ蒸留と蒸留塔（連続蒸留）の収支式は個別に解説されており、また蒸留塔の演習では階段作図（マッケブ・シーレ法）による理論段と還流比の関係を検討させている。本稿のなかで示さなかったが、EQUATRAN-G による演習の1回はこの階段作図も実施している。このようなツールを用いた一連の演習で、気液平衡による分離操作の仕組みや分離効果に及ぼす因子について、より視覚的に、かつ多角的に理解ができるようになった。学生からのレポートには、「蒸留の意味合いがよく理解できた」という感想が寄せられている。

また、IIIで触れた、プロセスシミュレータでは単位操作がブラックボックスになってしまう弊害に対して、単位操作を数式モデルで記述する本コンピュータ演習は1つの回答を与えていると考える。



V 結言

気液平衡という基礎現象から出発し、モデル式を追加して分離計算を行い、さらにモジュールをシステム化して、最終的には工業的な装置にくみ上げるような演習を試みた。方程式解法ソフト EQUATRAN-G を用いることで、プログラミングせずに数式モデルで問題を考えさせる演習ができた。さらに、モジュラー・モデリングツール VM-EQUATRAN により機能モジュールのモデルをシステム化していくことで、システム的な思考を養うことができた。

本演習では収支計算を行う定常状態モデルを取り扱ったが、反応速度式を組み込んだバッチ反応器をモデル化し、ジャケットで除熱を行い、さらに温度調節の制御系を付加することで、反応、伝熱、制御という単位操作を取り入れたダイナミックモデルでの演習に発展させることもできる。

現象を理論的な裏付けでモデル化し、再現させることで解析したり、予測を立てたりできるモデリングする力を養うことは、化学工学にとどまらず、工学全体に共通の基礎技術であり、教育の中でもっと重視されてもよいと考える。

【謝辞】

この演習の授業を行う機会を与えていただき、助言を賜った明治大学理工学部応用化学科の古谷英二教授に感謝の意を表します。

【参考文献】

- Cutlip, Michael B. and Mordechai Shacham (1999) *Problem Solving in Chemical Engineering with Numerical Methods*, Prentice Hall.
- 化学工学会編 (2002) 「化学工学会の将来像についての提言－VISION2011 委員会報告」, 『化学工学』, 66(3), 118-134.
- 長谷部伸治 (2006) 「京都大学におけるプロセス設計教育」, 『化学工学会第38回秋季大会予稿集』, S223, 福岡.
- 伊東章, 上江洲一也 (2006) 『Excel で気軽に化学工学』, 丸善.
- 伊東章 (2008) 「化学工学分野における新しい工学・技術教育の実践」, 『工学教育』, 56(2), 63.
- Seider, Warren D., J. D. Seader and Daniel R. Lewin (2003) *Product and Process Design Principles*, John Wiley and Sons.

Yokoyama, K. and G. Oguchi (1999) “Application of Equation-solver EQUATRAN-G for Separation Process Engineering”, *Proceedings of the 5th International Symposium on Separation Technology between Korea and Japan*, 217-220, Seoul.